quasi-spin 形式を使った計算

2002 年 11 月 22 日

1　quasi-spin の導入

まず、spin 昇降演算子及び spin 演算子の 0 成分 (z 成分)S_+, S_-, S_0 を以下のように導入する。

$$S_+ \equiv \sum_{m>0} a_m^\dagger a_{\bar{m}}^\dagger \tag{1}$$

$$S_- \equiv \sum_{m>0} a_{\bar{m}} a_m \tag{2}$$

$$S_0 \equiv \frac{1}{2}(N - \Omega) \tag{3}$$

その際、各々の交換関係を取って見ると確かにスピン演算子の交換関係を満たす。この演算子を準スピン演算子 (quasi-spin operator) と呼ぶ。

実際、それを計算で見てみます。

$$[S_+, S_-] = \sum_{m,m'>0} a_m^\dagger a_{\bar{m}}^\dagger a_{\bar{m}'} a_{m'} - a_{\bar{m}'} a_{m'} a_m^\dagger a_{\bar{m}}^\dagger \tag{4}$$

計算をする際の注意:第二量子化された演算子には、基本となる並び順 (正規順序) があります。それは、

$$a^\dagger a^\dagger \cdots a a \cdots \tag{5}$$

というように、(生成演算子)(消滅演算子) という形です。この演算子の並び順だと、真空に作用したら 0 です。すべての演算子をこの形になるように変形していくのが計算の基本です。

ですので、(4) 式の交換関係も、第一項目は正規順序になっているのでこのままにして第二項目を変形していけばよいです。

$$\begin{aligned}
a_{\bar{m}'}a_{m'}a_m^\dagger a_{\bar{m}}^\dagger &= a_{\bar{m}'}a_{m'}, a_m^\dagger a_{\bar{m}}^\dagger - a_{\bar{m}'}a_m^\dagger a_{m'}a_{\bar{m}}^\dagger \\
&= \delta_{m,m'}a_{\bar{m}'}a_{\bar{m}}^\dagger - a_{\bar{m}'}a_m^\dagger a_{m'}a_{\bar{m}}^\dagger \\
&= \delta_{m,m'}a_{\bar{m}'}a_{\bar{m}}^\dagger + a_m^\dagger a_{\bar{m}'}a_{m'}a_{\bar{m}}^\dagger \\
&= \delta_{m,m'}\delta_{m,m'} - \delta_{m,m'}a_{\bar{m}}^\dagger a_{\bar{m}'} + a_m^\dagger a_{\bar{m}'}a_{m'}a_{\bar{m}}^\dagger \\
&= \delta_{m,m'}\delta_{m,m'} - \delta_{m,m'}a_{\bar{m}}^\dagger a_{\bar{m}'} - a_m^\dagger a_{\bar{m}'}a_{\bar{m}}^\dagger a_{m'} \\
&= \delta_{m,m'}\delta_{m,m'} - \delta_{m,m'}a_{\bar{m}}^\dagger a_{\bar{m}'} - \delta_{m,m'}a_m^\dagger a_{m'} + a_m^\dagger a_{\bar{m}}^\dagger a_{\bar{m}'}a_{m'} \qquad (6)
\end{aligned}$$

従って、(4) 式は

$$\begin{aligned}
[S_+, S_-] &= \sum_{m,m'>0} a_m^\dagger a_{\bar{m}}^\dagger a_{\bar{m}'}a_{m'} - a_{\bar{m}'}a_{m'}a_m^\dagger a_{\bar{m}}^\dagger \\
&= \sum_{m,m'>0} -\delta_{m,m'}\delta_{m,m'} + \delta_{m,m'}(a_{\bar{m}}^\dagger a_{\bar{m}'} + a_m^\dagger a_{m'}) \\
&= -\Omega + N = 2S_0 \qquad (7)
\end{aligned}$$

となる。他の交換関係についても同様に計算できます。

$$[S_0, S_+] = S_+ \qquad (8)$$

$$[S_0, S_-] = -S_- \qquad (9)$$

この時、ペアリング相互作用 H^G は

$$H^G = -GS_+S_- \qquad (10)$$

と書ける。また、

$$S_+ S_- = S^2 - S_0(S_0 - 1) \tag{11}$$

なので、この相互作用の固有状態はスピンの大きさ S およびその射影成分 S_0 で指定される。

あとで、Seniority の計算に必要なので以下のオペレータを定義しておきます。

$$\begin{aligned} s_{m+} &\equiv a_m^\dagger a_{\bar{m}}^\dagger \\ s_{m-} &\equiv a_{\bar{m}} a_m \\ N_m &\equiv a_m^\dagger a_m + a_{\bar{m}}^\dagger a_{\bar{m}} \end{aligned} \tag{12}$$

そうすると、

$$[s_{m+}, s_{m'-}] = \delta_{m,m'}(1 - N_m) \tag{13}$$

$$[N_{m'}, s_{m+}] = 2\delta_{m,m'} s_{m+} \tag{14}$$

$$[N_{m'}, s_{m-}] = -2\delta_{m,m'} s_{m-} \tag{15}$$

です。

2 Seniority の計算

さて、次に Seniority の定義および、実際に Seniority の計算をしてみましょう。

Seniority の定義: 「Seniority とはハミルトニアン (10) の固有状態を分類する指標で、ある固有状態に対して $I = 0$ に組まれていない粒子数のことであり、これを nu と表す。」

具体的に式で定義することにする。まず固有状態を

$$|\Phi_\lambda\rangle = |\lambda; S, S_0\rangle \tag{16}$$

と書く。

$I = 0$ に組まれていない粒子数を数えたいのであるから、まず $I = 0$ に組まれている粒子のペアを全て消してしまって、その後粒子数演算子 N を掛けて残った粒子数を数えればよい。

S_+ を掛けると、一つ $I = 0$ というペアを作る。$(|\Psi^{I=0}\rangle = \frac{1}{\Omega} S_+|0\rangle)$ したがって、このペアを全て消すには (16) で S_- を $S_0 = -S$ となるまで掛けていけばよい。

以上で、準備が整ったので Seniority を定義できる。

$$N(S_-)^n|\Phi_\lambda\rangle = N(S_-)^n|\lambda; S, S_0\rangle = N|\lambda; S, -S\rangle \equiv nu|\lambda; S, -S\rangle \tag{17}$$

実際に、Seniority を計算してテキスト中で書かれている Seniority が正しいかチェックしてみます。 text p.297 の状態 $\Psi_0 = \frac{1}{\Omega} S_+|0\rangle$ に対しては、$(A^\dagger \to S_+, A \to S_-$ と書き換えられることに注意。$)$

$$(S_-)^2\Psi_0 = 0 \tag{18}$$

なので、

$$\begin{aligned} nuS_-\Psi_0 = NS_-\Psi_0 &= \frac{1}{sqrt\Omega} N([S_-, S_+] + S_+S_-)|0\rangle \\ &= -\frac{1}{sqrt\Omega} 2NS_0|0\rangle \\ &= \frac{sqrt\Omega}{N}|0\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \tag{19}$$

となって確かに Seniority は 0 となる。

次に Ψ_λ に対して Seniority を計算する。

$$\begin{aligned} S_-\Psi_\lambda &= \sum_{m,m'} c_m^\lambda s_{m-} s_{m+}|0\rangle \\ &= -\sum_{m,m'} c_m^\lambda \delta_{m,m'}(1-N_m)|0\rangle \\ &= -\sum_m c_m^\lambda |0\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \tag{20}$$

なので、Seniority は

$$\begin{aligned} nu\Psi_\lambda = N\Psi_\lambda &= \sum_{m,m'} c_m^\lambda N_{m'} s_{m+}|0\rangle \\ &= 2\sum_m c_m^\lambda s_{m+}|0\rangle \\ &= 2\Psi_\lambda \end{aligned} \tag{21}$$

で $nu = 2$ となる。

3 $E(n, nu)$ の計算

粒子数が n で Seniority が nu の場合の固有エネルギーを求めます。
まず、初めにスピンの大きさ S と Seniority nu との関係を求めます。

$$\begin{aligned} S^2|\lambda; S, -S\rangle &= S(S+1)|\lambda; S, -S\rangle \\ &= S_+S_- + S_0(S_0-1)|\lambda; S, -S\rangle \\ &= S_0(S_0-1)|\lambda; S, -S\rangle \\ &= \frac{1}{2}(nu-\Omega)\frac{1}{2}(nu-\Omega)-1|\lambda; S, -S\rangle \end{aligned} \tag{22}$$

ここから、$S = \frac{1}{2}(\Omega - nu)$ を得ます。また、$S_0 = \frac{1}{2}(n - \Omega)$ であるので、固有状態 $|\lambda; S, S_0\rangle$ は、粒子数 n および Seniority　nu で指定できます。

$$\begin{aligned} E(n, nu)|n, nu\rangle &= H^G|\lambda; S, S_0\rangle = -GS_+S_-|\lambda; S, S_0\rangle \\ &= -GS^2 - S_0(S_0 - 1)|\lambda; S, S_0\rangle \end{aligned} \tag{23}$$

従って、最終的に

$$E(n, nu) = -\frac{1}{4}G(n - nu)(2\Omega - n - nu + 2) \tag{24}$$

を得ます。